



INRS SCIENCE
CONFERENCE ROUND

inrs
Institut National de Recherche et de Sécurité

RECUEIL DES RÉSUMÉS

Conférence INRS 2015
sur la recherche en santé au travail

**8.9.10
avril
2015**

Nancy, France

LE RISQUE CHIMIQUE

MÉTHODES ET TECHNIQUES INNOVANTES



#chimie2015

organisé en partenariat avec  **perosh**
PARTNERSHIP FOR EUROPEAN RESEARCH
IN OCCUPATIONAL SAFETY AND HEALTH

Portée et limites des modèles informatiques dans l'évaluation du risque chimique In silico veritas ?

Vernez D.¹

¹ Institut universitaire romand de santé au travail, Université de Lausanne et Genève, Lausanne, CH

La simulation numérique et la modélisation se sont imposées comme des outils indispensables dans le domaine de l'évaluation des risques chimiques. La capacité de ces outils à produire de grandes quantités de données à moindres ressources et à traiter des problèmes trop complexes pour être solutionnés analytiquement explique en grande partie leur succès. Leur usage, autrefois réservé à des spécialistes, s'est largement démocratisé et de nombreuses applications sont maintenant disponibles dans le domaine public.

Du fait de leur rapidité de mise en œuvre, ces outils sont fréquemment utilisés en première intention (screening), pour soutenir, et parfois se substituer, au jugement d'expert. Leur usage en tant que complément à l'expérimentation ou l'investigation de terrain, parfois difficilement accessible, tend aussi à se développer. Pour les usagers finaux, ces modèles sont souvent des "boîtes noires" dont seules les données entrantes et sortantes sont accessibles. Les informations relatives aux limites fonctionnelles des modèles, à leur validité ou, d'une façon plus générale à leurs performances sont, lorsqu'elles existent, peu connues des utilisateurs.

Trois exemples peuvent être mentionnés pour illustrer la question des limites et des incertitudes de la modélisation :

- La modélisation toxicocinétique, qui permet la prédiction de la distribution, de la métabolisation et de l'excrétion des polluants dans l'organisme. Les modèles toxicocinétiques sont particulièrement précieux dans l'identification et la quantification d'indicateurs biologiques d'exposition pertinents.
- L'utilisation des modèles QSAR dans l'évaluation de la perméation cutanée des polluants. Ceux-ci permettent, sur la base de quelques paramètres physico-chimiques simples (masse moléculaire, partition octanol-eau, par exemple) d'estimer le flux de perméation d'une substance d'intérêt à travers la peau. Ils sont notamment utilisés, en l'absence de données expérimentales, pour estimer l'importance relative de l'intoxication systémique par la voie cutanée et respiratoire.
- Les modèles prédictifs de l'exposition aux polluants chimiques (gaz, vapeur, poussières). Ces modèles physiques, empiriques ou statistiques, sont largement utilisés comme outils de screening en hygiène du travail. Leur usage s'est aussi répandu dans le domaine réglementaire, dans le cadre de REACH, où ils permettent une estimation des expositions prévisibles avant la mise sur le marché des préparations.

L'usage croissant de la modélisation, parfois comme alternative au jugement d'expert ou à la métrologie, pose la question de la portée et des limites des modèles. Des efforts considérables ont été investis dans la connaissance des incertitudes et limites des méthodes d'évaluation traditionnelles (p.ex. validation des méthodes analytiques) et, d'une façon plus générale, dans la transparence de l'expertise dans le domaine de l'évaluation des risques sanitaires. Dans un tel contexte, le recours à la modélisation ne peut constituer une alternative viable aux approches classiques que dans la mesure où des efforts similaires sont investis dans l'éclairage des incertitudes liées à cette approche. Au-delà du défi scientifique et technique, de la mise au point de nouveaux modèles, le véritable enjeu de développement se situe probablement dans une meilleure connaissance des outils et dans l'amélioration de leurs performances.